

$\pi$ - $\pi$  взаимодействие  
ароматических колец  
лекарственного  
соединения и PHE(31).

Молекула лекарственного средства в полости рецептора связывается с ARG(32,60), VAL(54), GLN(28), PHE(31), LYS(53).

Механизм действия лекарственных средств включает стадии захвата катионов металлов и выведение их из внутриклеточного пространства; а так же угнетения функций дигидрофолатредуктазы путем захвата атомов водорода. Найдены специфические контакты соединений с рецептором, обеспечивающие избирательное действие лекарственных средств.

Созданы прогностические модели для анализа и оценки новых потенциальных лекарственных средств. Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ.

1. Potemkin V.A., Bartashevich E.V., Grishina M.A., Guccione S. Rational Approaches to Drug Design.- Barcelona: Prous Science Publishers, 2001.- P. 349 – 353.

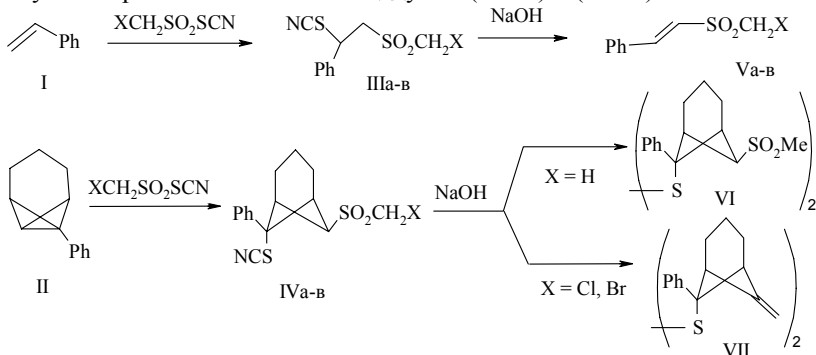
## О РЕАКЦИЯХ МЕТАНСУЛЬФОТИОЦИАНАТОВ СО СТИРОЛОМ И 1-ФЕНИЛТРИЦИКЛО[4.1.0.0<sup>2,7</sup>]ГЕПТАНОМ

*Петров П. С., Чалов П. А., Васин В. А.*

Мордовский государственный университет, Саранск

Гомолитическое сульфони́рование непредельных соединений служит удобным способом получения алкилсульфо́нов – ценных исходных соединений в многостадийных синтезах. Ранее [1] сообщалось об использовании для этих целей некоторых арилсульфотиоцианатов. Мы изучили взаимодействие метан-, хлорметан- и бромметансульфотиоцианатов с двумя модельными соединениями – стиролом (I) и 1-фенилтрицикло[4.1.0.0<sup>2,7</sup>]гептаном (II). Необходимые сульфотиоцианаты получали восстановлением соответствующих сульфохлоридов системой  $\text{Na}_2\text{SO}_3$ – $\text{NaHCO}_3$  при 0 °С с последующей обработкой образующихся сульфидатов натрия бензольным раствором диуродана. Отметим, что ранее галогенметансульфотиоцианаты в литературе описаны не были. Реакции сульфороданирования проводили путем смешения и выдержива-

ния в течение 8 – 10 ч при 20 °С растворов эквимольных количеств реагентов в бензоле. Во всех случаях с удовлетворительными выходами получены кристаллические моноаддукты (IIIa-в) и (IVa-в).



X = H (а), Cl (б), Br (в)

Кратковременная обработка аддуктов (IIIa-в) водно-диоксановым раствором NaOH приводит к элиминированию HSCN, в результате чего образуются известные [2,3] метил(β-стирил)сульфоны (Va-в). Аддукты (IVa-в) в тех же условиях превращаются в дисульфиды (VI) и (VII) соответственно. Строение всех новых соединений установлено методами ИК, ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C спектроскопии.

1. Wolf G. C., *J. Org. Chem.*, 1974, 39, 3454.
2. Vasin V. A., Bolusheva I. Yu., Razin V. V., *Sulfur Lett.*, 2003, 26, 101.
3. Vasin V. A., Bolusheva I. Yu., Razin V. V., *J. Sulfur Chem.*, 2005, 26, 139.

## ИЗУЧЕНИЕ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ МЕТИЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ФЕНИЛЦИКЛОАЛКАНОВ В ПРОЦЕССЕ ИХ ЖИДКОФАЗНОГО ОКИСЛЕНИЯ

Курганова Е.А., Балукова А.А., Кратирова Д.Д.

Ярославский государственный технический университет

Гидропероксидное окисление метилпроизводных фенилциклоалканов (I) лежит в основе совместного получения метилфенолов (крезолов, ксиленолов) и циклогексанона по схеме

